

# UNIVERSIDAD DE BURGOS

## ESCUELA DE DOCTORADO

### TESIS DOCTORALES

**TÍTULO:** NUMERICAL MODELS FOR SIMULATING HYDROGEN DIFFUSION AND EMBRITTLEMENT IN HIGH STRENGTH STEELS

**AUTOR:** DÍAZ PORTUGAL , ANDRÉS  
**PROGRAMA DE DOCTORADO:** TECNOLOGÍAS INDUSTRIALES E INGENIERÍA CIVIL

**FECHA LECTURA:** 20/10/2017  
**HORA:** 12:30  
**CENTRO LECTURA:** ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR. SALA DE JUNTAS 1. CAMPUS RÍO VENA.  
**DIRECTORES:** JESÚS MANUEL ALEGRE CALDERÓN

**TRIBUNAL:** COVADONGA BETEGÓN BIEMPICA  
ISIDORO IVÁN CUESTA SEGURA  
JAVIER SÁNCHEZ MONTERO  
EMILIO MARTÍNEZ PAÑEDA  
SERGIO CICERO GONZÁLEZ

**RESUMEN:** Esta tesis presenta y discute la modelización de la difusión de hidrógeno en metales como un primer paso para predecir y mitigar la fractura asistida por hidrógeno. La fragilización por hidrógeno es un fenómeno mediante el cual se degradan los metales y las aleaciones, siendo habituales los fallos de componentes industriales debido a este hecho. Sin embargo, la relación entre el hidrógeno y la transición de un modo dúctil a uno frágil de fractura no está del todo clara. Aunque el mecanismo que funciona a escalas nano y microscópicas todavía no se entiende completamente, se ha demostrado que la fragilización es proporcional a la concentración de hidrógeno dentro de un metal. Por lo tanto, el presente trabajo tiene como objetivo establecer, validar, implementar y analizar un modelo numérico para simular la difusión de hidrógeno, en el marco de la Mecánica de los Medios Continuos y por medio de un software de Elementos Finitos.

Los fenómenos de difusión son revisados bibliográficamente y se particularizan para el transporte de hidrógeno en metales. En particular, se elige un modelo de "dos niveles", considerando explícitamente los efectos de las trampas de hidrógeno, para simular la difusión de hidrógeno cerca de la punta de grieta. Los campos de tensión y deformación presentes en una grieta o entalla están relacionados con la difusión de hidrógeno; además, el hidrógeno favorece un ablandamiento local, una dilatación y una reducción de la energía cohesiva, por lo que debe considerarse un comportamiento acoplado entre la difusión, la elasto-plasticidad y el daño.

Finalmente, los modelos numéricos de difusión se aplican a la simulación de fractura en un enfoque de Modelo de Zona Cohesiva y se reproduce un ensayo de tracción de una probeta entallada, lo que demuestra que la combinación de difusión con modelos de daño puede predecir la fractura frágil. Además, se ha simulado la difusión de hidrógeno en la pared de una vasija destinada a almacenar  $H_2$  a presión, con el propósito de encontrar distribuciones de hidrógeno cerca de concentradores de tensión; la influencia de cargas cíclicas y tensiones residuales de compresión también se evalúan en estos depósitos.

**Palabras clave:** hidrógeno, difusión, fragilización, fractura, elementos finitos